Mécanique Quantique 1 —— CORRIGÉ

La première partie de ce document donne la correction détaillée de la séance d'exercice 1 sur les états liés du puits carré. La deuxième partie de ce document propose un exercice similaire mais sur l'oscillateur harmonique. Ceci n'a pas été vu en classe, mais est lié à la matière du cours.

Séance d'exercices 1 : États liés du puits carré.

PUITS CARRÉ INFINI EN 1 DIMENSION

Exercice a

Notez d'abord que le puits étant infini, il n'admet que des états liés !
À l'extérieur du puits, le potentiel étant infini, la fonction d'onde est nulle. Comme la fonction d'onde doit être continue, on en déduit les conditions limites de la fonction d'onde à l'intérieur du puits :

$$\psi(0) = \psi(L) = 0$$

Pour trouver la forme de la fonction d'onde à l'intérieur du puits, on résout l'équation de Schrödinger indépendante du temps, en une dimension, qui est donnée par :

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x)\right)\psi(x) = E\,\psi(x)$$

Comme le potentiel est nul, cela devient simplement

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi(x) = E\,\psi(x)$$

ou encore, en posant $k = \sqrt{2mE}/\hbar$,

$$-\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi(x) = k^2\,\psi(x).$$

La solution de cette équation différentielle est donnée par des sinus et cosinus. Ainsi, de façon générale, la solution est

$$\psi(x) = A\sin(kx) + B\cos(kx).$$

En utilisant les conditions limites mentionnées précédemment, on trouve

$$\begin{aligned} \psi(0) = 0 \quad &\Rightarrow \quad B = 0 \\ \psi(L) = 0 \quad &\Rightarrow \quad A\sin(kL) = 0 \quad \Rightarrow \quad kL = n\pi \end{aligned}$$

où n est un entier positif. Ainsi,

$$\psi(x) = A\sin\left(n\pi\frac{x}{L}\right)$$

Pour trouver la valeur de A il reste à normaliser la fonction :

$$\begin{aligned}
\int_0^L |\psi(x)|^2 dx &= A^2 \int_0^L \sin^2\left(n\pi \frac{x}{L}\right) dx \\
&= A^2 L \int_0^1 \sin^2(n\pi y) dy \qquad \text{où on a posé } y = x/L \\
&= A^2 L \int_0^1 \frac{1-\cos(2n\pi y)}{2} dy \\
&= A^2 L \left(\frac{y}{2} - \frac{\sin(2n\pi y)}{4n\pi} \right) \Bigg|_0^1 \\
&= A^2 \frac{L}{2}
\end{aligned}$$

Puisque la norme de la fonction d'onde vaut 1 on trouve que $A = \sqrt{2/L}$ et donc

$$\psi_n(x) = \begin{cases} \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(n\pi \frac{x}{L}\right) & \text{si } 0 \leq x \leq L \\ 0 & \text{sinon} \end{cases}$$

Notez que n représente ici le nombre quantique.

Exercice b

Puisque, de l'exercice précédent on tire que $k = \sqrt{2mE}/\hbar$ et $kL = n\pi$, on en déduit facilement que les énergies propres du puits infini sont

$$E_n = \frac{k^2\hbar^2}{2m} = n^2 \frac{\pi^2\hbar^2}{2mL^2}.$$

Puisque n est entier, on comprend ici que l'énergie est quantifiée.
Remarquez que si le puits carré est de profondeur finie V_0, on a une solution $\psi(x)$ non nulle à l'extérieur du puits, comme on le verra à l'exercice 3. Dans ce cas là, il y aura également un nombre fini d'états liés.

PUITS CARRÉ INFINI EN 3 DIMENSIONS

Exercice a

L'équation de Schrödinger indépendante du temps, en 3 dimensions, est donnée par :

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) + V^{(3)}(x,y,z) \right] \psi(x,y,z) = E\, \psi(x,y,z)$$

En supposant que la solution a la forme $\psi(x,y,z) = \psi_1(x)\psi_2(y)\psi_3(z)$, on trouve

$$\begin{aligned}
\psi_2(y)\psi_3(z) \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi_1(x)}{\partial x^2} + V_1(x)\psi_1(x) \right) &+ \psi_1(x)\psi_3(z) \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi_2(y)}{\partial y^2} + V_2(y)\psi_2(y) \right) \\
&+ \psi_1(x)\psi_2(y) \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi_3(z)}{\partial z^2} + V_3(z)\psi_3(z) \right) \\
&= \psi_2(y)\psi_3(z) \left(E_1 \psi_1(x) \right) + \psi_1(x)\psi_3(z) \left(E_2 \psi_2(y) \right) \\
&+ \psi_1(x)\psi_2(y) \left(E_3 \psi_3(z) \right)
\end{aligned}$$

où on a posé que $E = E_1 + E_2 + E_3$. En divisant par $\psi_1(x)\psi_2(y)\psi_3(z)$ on obtient l'écriture suivante :

$$\begin{aligned}
\underbrace{\psi_1(x)^{-1}\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi_1(x)}{\partial x^2} + V_1(x)\psi_1(x)\right)}_{\text{fonction de } x} &+ \underbrace{\psi_2(y)^{-1}\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi_2(y)}{\partial y^2} + V_2(y)\psi_2(y)\right)}_{\text{fonction de } y} \\
&+ \underbrace{\psi_3(z)^{-1}\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi_3(z)}{\partial z^2} + V_3(z)\psi_3(z)\right)}_{\text{fonction de } z} \\
= \underbrace{E_1 + E_2 + E_3}_{\text{constante}} &
\end{aligned}$$

La seule configuration possible est que chacune des fonctions de x, y et z soit égale à une constante, que l'on choisit être respecivement E_1, E_2 et E_3. On a donc 3 fois un problème unidimensionnel qui se ramène en fait au cas étudié à l'exercice 1 :

$$\left(\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x_i^2} + V_i(x_i)\right)\psi_i(x_i) = E_i\psi_i(x_i)$$

pour i=1,2,3. La solution générale dépend alors de trois nombres quantiques n_1, n_2 et n_3 :

$$\psi_{n_1,n_2,n_3}(x,y,z) = \sqrt{\frac{8}{L_1L_2L_3}}\sin\left(n_1\pi\frac{x}{L_1}\right)\sin\left(n_2\pi\frac{y}{L_2}\right)\sin\left(n_3\pi\frac{z}{L_3}\right)$$

Exercice b

En se basant également sur le résultat de l'exercice 1, on trouve que les énergies liées sont :

$$E_{n_1,n_2,n_3} = \frac{\pi^2\hbar^2}{2m}\left(\frac{n_1^2}{L_1^2} + \frac{n_2^2}{L_2^2} + \frac{n_3^2}{L_3^2}\right)$$

Remarquez que dans ce cas-là, certaines dégénérescences sont possibles.

Exercice c

Ici, on cherche à calculer le nombre d'états quantique $N(E_0)$ dans la boîte dont l'énergie est inférieure à une certaine valeur E_0. On cherche donc $N(E_0)$ tel que

$$\frac{n_1^2}{L_1^2} + \frac{n_2^2}{L_2^2} + \frac{n_3^2}{L_3^2} \leq \frac{2mE_0}{\pi^2\hbar^2}$$

On remarque que c'est comme calculer le nombre d'états à l'intérieur d'une sphère de rayon

$$R = \frac{\sqrt{2mE_0}}{\pi\hbar}$$

en sachant que la densité de points est $L_1L_2L_3$ (l'unité de longueur de la coordonnée i est n_i/L_i). On approxime le résultat en oubliant que les n_i sont entiers et donc il suffit de calculer le volume de la sphère multiplié par sa densité. Par contre, il ne faut pas oublier que les n_i ne peuvent être que positifs et donc on ne prend qu'un huitième du volume de la sphère. :

$$\begin{aligned}
N(E_0) &\approx \frac{1}{8} \times \text{volume} \times \text{densité} \\
&= \frac{1}{8}\frac{4\pi}{3}\frac{(2mE_0)^{3/2}}{\pi^3\hbar^3} \times L_1L_2L_3 \\
&= \frac{\frac{4\pi}{3}p_0^3\ L_1L_2L_3}{h^3}
\end{aligned}$$

où à la dernière ligne on a posé que $\hbar = \frac{h}{2\pi}$ et $p_0 = \sqrt{2mE_0}$. p_0 représente l'impulsion d'une particule de masse m dont l'énergie cinétique est E_0.
Ainsi, on remarque dans la dernière équation que $L_1L_2L_3$ représente le volume dans l'espace des positions alors que $4\pi p_0^3/3$ représente le volume dans l'espace des impulsions.
Dans une volume arbitraire de l'espace des phases, le nombre d'états quantiques indépendants est en fait donné par

$$N \approx \frac{\Delta x \Delta y \Delta z \cdot \Delta p_x \Delta p_y \Delta p_z}{h^3}$$

C'est comme si chaque état se trouvait dans une petit boîte de côté h.
Lorsqu'il s'agit de fermions, cela revient simplement à compter le nombre de particules dans la boîte jusqu'à une certaine énergie, puisqu'il n'y a qu'une seule particule par niveau (on ne peut pas mettre plus d'un fermion par petite boîte). Notez également que l'on ne connaît par précisément x et p à l'intérieur de la petite boîte.

PUITS CARRÉ FINI EN 3 DIMENSIONS

Exercice a

L'équation de Schrödinger stationnaire pour une particule de masse m a la forme suivante :

$$H\psi = E\psi \qquad \Leftrightarrow \qquad \Big(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\mathbf{r})\Big)\psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r})$$

où le laplacien en coordonnées sphérique est

$$\nabla^2 = \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\Big(r^2\frac{\partial}{\partial r}\Big) + \frac{1}{r^2}\left(\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\Big(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\Big) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}\right)$$

Ainsi, l'équation de Schrödinger devient

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2mr^2}\frac{\partial}{\partial r}\Big(r^2\frac{\partial}{\partial r}\Big) - \frac{\hbar^2}{2mr^2}\left(\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\Big(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\Big) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}\right) + V(r)\right]\psi(r,\theta,\phi) = E\psi(r,\theta,\phi)$$

En multipliant l'équation par $2mr^2$, on peut rendre l'équation séparable :

$$\left[-\hbar^2\frac{\partial}{\partial r}\Big(r^2\frac{\partial}{\partial r}\Big) - \hbar^2\left(\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\Big(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\Big) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}\right) + 2mr^2V(r)\right]\psi(r,\theta,\phi) = 2mr^2E\psi(r,\theta,\phi)$$

ou encore

$$\underbrace{\left[-\hbar^2\frac{\partial}{\partial r}\Big(r^2\frac{\partial}{\partial r}\Big) + 2mr^2\big(V(r)-E\big)\right]}_{\text{partie radiale}}\psi(r,\theta,\phi) = \underbrace{\hbar^2\left(\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\Big(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\Big) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}\right)}_{\text{partie angulaire}}\psi(r,\theta,\phi)$$

Exercice b

$$[energie] = \frac{[p^2]}{[2m]} = \frac{[(\hbar/longueur)^2]}{[2m]} = \frac{\hbar^2}{2ma^2}$$

où on utilise le fait que $\Delta x\Delta p \geq \hbar$ pour trouver que l'unité de p est celle de $\hbar/longueur$.
Notez qu'on veut rendre r également sans dimension. Pour ceci on définit une variable $r' = r/a$ qui est sans dimension. Alors, $\frac{\partial}{\partial r'} = a\frac{\partial}{\partial r}$ et $\frac{\partial}{\partial r'}\left(r'^2\frac{\partial}{\partial r'}\right) = \frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right)$ et l'équation de Schrödinger devient

$$\left[-\hbar^2\frac{\partial}{\partial r'}\left(r'^2\frac{\partial}{\partial r'}\right)+2ma^2r'^2\big(V(r')-E\big)\right]\psi(r',\theta,\phi)=\hbar^2\left(\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\Big(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\Big)+\frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}\right)\psi(r',\theta,\phi)$$

ou encore (en renommant r'=r)

$$\underbrace{\left[-\frac{\partial}{\partial r}\Big(r^2\frac{\partial}{\partial r}\Big)+\left(\frac{2ma^2}{\hbar^2}\right)r^2\big(V(r)-E\big)\right]}_{\text{partie radiale}}\psi(r,\theta,\phi)=\underbrace{\left(\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\Big(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\Big)+\frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}\right)}_{\text{partie angulaire}}\psi(r,\theta,\phi)$$

Si on choisit les unités telles que $\hbar=2m=a=1$, alors l'équation de Schrödinger devient

$$\underbrace{\left[-\frac{\partial}{\partial r}\Big(r^2\frac{\partial}{\partial r}\Big)+r^2\big(V(r)-E\big)\right]}_{\text{partie radiale}}\psi(r,\theta,\phi)=\underbrace{\left(\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\Big(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\Big)+\frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}\right)}_{\text{partie angulaire}}\psi(r,\theta,\phi)$$

Exercice c

Posons $\psi(r,\theta,\phi)=r^{-1}u_l(r)Y_l^m(\Omega)$. L'équation de Schrödinger devient donc

$$\left[-\frac{\partial}{\partial r}\Big(r^2\frac{\partial}{\partial r}\Big)+r^2\big(V(r)-E\big)\right]r^{-1}u_l(r)Y_l^m(\Omega)=\left(\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\Big(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\Big)+\frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}\right)r^{-1}u_l(r)Y_l^m(\Omega)$$

ou encore

$$\frac{r}{u_l(r)}\left[-\frac{\partial}{\partial r}\Big(r^2\frac{\partial}{\partial r}\Big)+r^2\big(V(r)-E\big)\right]r^{-1}u_l(r)=\frac{1}{Y_l^m(\Omega)}\left(\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\Big(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\Big)+\frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}\right)Y_l^m(\Omega)$$

On remarque que la partie gauche de l'équation ne dépend que de r alors que la dépendance de la partie droite de l'équation est uniquement angulaire. Cela signifie donc que chacun des côté de l'équation est égal à une constante. On choisi cette constante comme étant $-l(l+1)$. Bien sûr, ce choix n'est pas arbitraire. Il vient du fait que l'équation

$$\left(\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\Big(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\Big)+\frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}\right)Y_l^m(\Omega)=-l(l+1)Y_l^m(\Omega)$$

où

$$\left(\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\Big(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\Big)+\frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}\right)=-L^2$$

est bien connue et ses solutions sont les harmoniques sphériques Y_m^l où l est le nombre quantique azimutal et m le nombre quantique magnétique. Rappelez-vous qu'il y a une solution différente pour chaque valeur de m et l.

Revenons maintenant à l'équation radiale qui devient

$$
\begin{aligned}
\frac{r}{u_l(r)}\left[-\frac{\partial}{\partial r}\Big(r^2\frac{\partial}{\partial r}\Big)+r^2\big(V(r)-E\big)\right]r^{-1}u_l(r) &= -l(l+1)\\
-\frac{\partial}{\partial r}\Big(r^2\frac{\partial}{\partial r}\frac{u_l(r)}{r}\Big)+r^2\big(V(r)-E\big)\frac{u_l(r)}{r} &= -\frac{u_l(r)}{r}\,l(l+1)\\
-\frac{\partial}{\partial r}\Big(r\frac{\partial}{\partial r}u_l(r)-u_l(r)\Big)+r^2\big(V(r)-E\big)\frac{u_l(r)}{r} &= -\frac{u_l(r)}{r}\,l(l+1)\\
-r\frac{\partial^2}{\partial r^2}u_l(r)+r\big(V(r)-E\big)u_l(r) &= -\frac{u_l(r)}{r}\,l(l+1)\\
\left(-\frac{\partial^2}{\partial r^2}+\frac{l(l+1)}{r^2}+V(r)\right)u_l(r) &= E\,u_l(r)
\end{aligned}
$$

Pour l'onde s, on a $l=0$ et donc l'équation se simplifie en

$$\left(-\frac{\partial^2}{\partial r^2}+V(r)\right)u_0(r)=E\,u_0(r)$$

ou encore

$$\begin{cases}-u_0''(r)-V_0u_0(r)=Eu_0(r) & r<1\\ -u_0''(r)=Eu_0(r) & r>1\end{cases}$$

Exercice d

Dans ce problème, on cherche les états liés, c'est-à-dire ce qui ont une énergie qui se trouve dans le puits. On suppose donc que $-V_0<E<0$ et on pose $\alpha=\sqrt{V_0+E}$ et $\epsilon=\sqrt{-E}$. Ces deux constantes sont ainsi toujours positive et on peut donc réécrire nos équations

$$\begin{cases}u_0''(r)+\big(V_0+E\big)u_0(r)=0 & r<1\\ u_0''(r)+Eu_0(r)=0 & r>1\end{cases}\quad\Leftrightarrow\quad\begin{cases}u_0''(r)+\alpha^2u_0(r)=0 & r<1\\ u_0''(r)-\epsilon^2u_0(r)=0 & r>1\end{cases}$$

Les solutions de la première équation différentielle sont des exponentielles complexes de la forme $e^{\pm iar}$ ou encore des fonction $\cos(\alpha r)$ et $\sin(\alpha r)$ alors que les solutions de la seconde équation différentielle sont des exponentielles réelles de la forme $e^{\pm\epsilon r}$. Alors, pour avoir des solutions générales (équation différentielle du second ordre $\Rightarrow$ 2 constantes), on écrit :

$$\begin{cases}u_0(r)=A\sin(\alpha r)+B\cos(\alpha r) & r<1\\ u_0(r)=Ce^{-\epsilon r}+De^{\epsilon r} & r>1\end{cases}$$

Pour trouver la valeur des constantes, on utilise les conditions aux bords et les conditions de continuité :

1. Conditions aux bords
   (a) $\psi(0)$ doit être défini $\Rightarrow$ quand $r=0$, il faut que $u(0)=0 \quad\Rightarrow\quad B=0$
   (b) À l'infini, $u(r)$ ne doit pas diverger $\Rightarrow$ le terme en $e^{\epsilon r}$ doit disparaître $\Rightarrow$ $D=0$
2. Conditions de continuité
   (a) La fonction doit être continue $\Rightarrow$ $u_{r<1}(r=1)=u_{r>1}(r=1)$ $\Rightarrow$ $A\sin(\alpha)=Ce^{-\epsilon}$
   (b) La dérivée doit être continue $\Rightarrow$ $u'_{r<1}(r=1)=u'_{r>1}(r=1)$ $\Rightarrow$ $A\alpha\cos(\alpha)=-\epsilon Ce^{-\epsilon}$

La condition de continuité nous permet d'écrire A en fonction de C, mais pas de trouver leur valeur. On trouvera A en utilisant les condition de normalisation dans l'exercice 6. En attendant, en divisant les deux équations précédentes on trouve :

$$\tan(\alpha) = -\frac{\alpha}{\epsilon} \;\Leftrightarrow\; \tan(\sqrt{V_0 + E}) = -\frac{\sqrt{V_0 + E}}{\sqrt{-E}}$$

C'est une équation transcendante. Les valeurs de E qui résolvent cette équations sont les seules valeurs possibles de l'énergie. En examinant cette équation, on voit bien qu'il y aura un nombre discret de solutions et non pas une continuité ce qui fait que l'énergie sera quantifiée. Pour trouver les solutions de cette équation, il faut la tracer (ou la résoudre numériquement) et pour rendre le problème plus simple, on peut réécrire cette équation en terme de ϵ ou de α :

$$\tan(\sqrt{V_0 - \epsilon^2}) = -\sqrt{\frac{V_0}{\epsilon^2} - 1} \text{ ou } \tan(\alpha) = -\frac{\alpha}{\sqrt{V_0 - \alpha^2}}$$

Exercice e

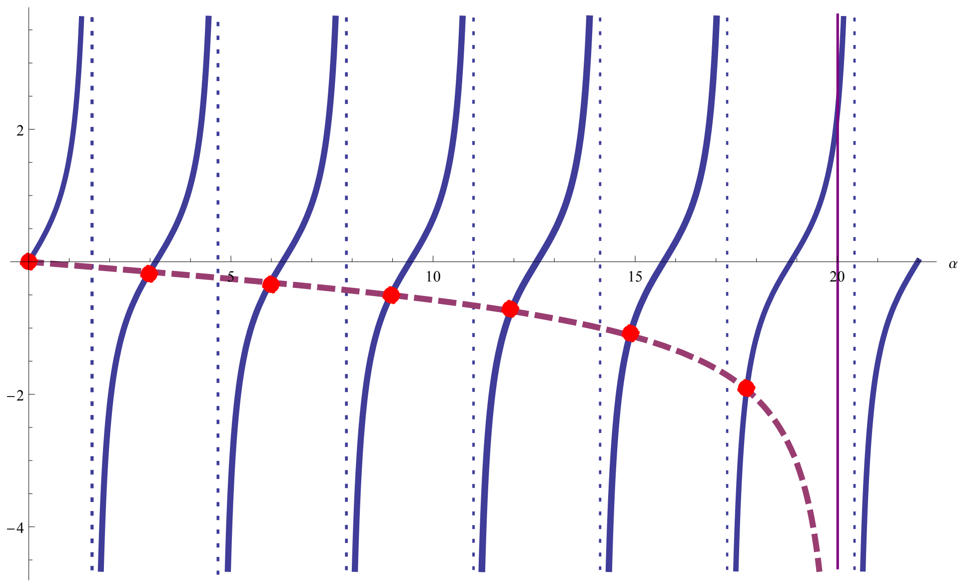
Intéressons-nous un peu plus à la fonction suivante :

$$f(\alpha) = -\frac{\alpha}{\sqrt{V_0 - \alpha^2}}$$

Sa dérivée est toujours négative :

$$f'(\alpha) = -\frac{\alpha^2}{(V_0 - \alpha^2)^{\frac{3}{2}}} - \frac{1}{\sqrt{V_0 - \alpha^2}}$$

f tend vers $-\infty$ et possède une asymptote verticale en $\alpha = \sqrt{V_0}$.
Pour résoudre l'équation transcendante $\tan(\alpha) = f(\alpha)$, on trace un graphique en fonction de α :



Notons d'abord que $\alpha = \sqrt{V_0 + E}$ peut prendre des valeurs comprises dans l'intervalle $[0, \sqrt{V_0}]$. Nous devons compter le nombre d'intersections entre $f(\alpha)$ et $\tan(\alpha)$ sur cet intervalle.
Peu importe la valeur du paramètre V_0, il y a toujours une intersection entre $f(\alpha)$ et $\tan(\alpha)$ à l'origine des axes. Cependant, cette solution ne correspond pas à un état physique. En effet, si $\alpha = 0$,

la fonction d'onde correspondante est identiquement nulle partout (comme on peut le voir en injectant $\alpha = 0$ dans l'exercice d).
On remarque ensuite qu'on aura une solution pour chaque asymptote de $\tan(\alpha)$ qui se trouve entre 0 et $\sqrt{V_0}$ (pour bien vous en convaincre, tracez le graphique pour différentes valeurs de V_0 et observez comment évolue le nombre de solutions) . La tangente aura une asymptote si

$$\tan(x) = \infty \qquad \Leftrightarrow \qquad x = \frac{\pi}{2} + n\pi \qquad n \in \mathbb{Z}$$

Ainsi, il y aura un état lié pour chaque valeur de n vérifiant :

$$0 \leq \frac{\pi}{2} + n\pi \leq \sqrt{V_0} \quad \Leftrightarrow \quad -\frac{\pi}{2} \leq n\pi \leq \sqrt{V_0} - \frac{\pi}{2} \quad \Leftrightarrow \quad -\frac{1}{2} \leq n \leq \frac{\sqrt{V_0}}{\pi} - \frac{1}{2}$$

Le nombre total d'états liés est donc la partie entière de $\frac{\sqrt{V_0}}{\pi} - \frac{1}{2}$, plus 1 car on compte $n = 0$.
Il y aura donc $\left\lfloor \frac{\sqrt{V_0}}{\pi} + \frac{1}{2} \right\rfloor$ états liés.

Exercice f

Si on retourne à nos solution $u_0(r)$, on a trouvé :

$$\begin{cases} u_0(r) = A\sin(\alpha r) & r < 1 \\ u_0(r) = A\sin(\alpha)e^{\epsilon}e^{-\epsilon r} & r > 1 \end{cases}$$

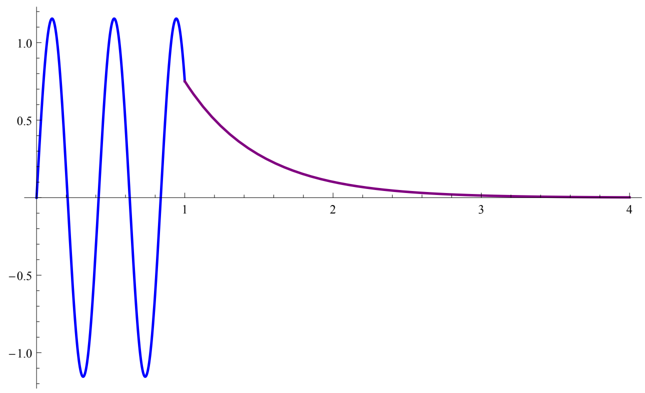
où, dans la seconde équation, on a écrit C en fonction de A en utilisant les conditions de continuité de la fonction. La condition de normalisation va nous permettre de trouver la valeur de A. Pour normaliser la fonction, il faut que

$$\int_{-\infty}^{\infty} d^3x|\psi(x)|^2 = 1 \;\; \Leftrightarrow \;\; \int_0^{\infty}\int_0^{\pi}\int_0^{2\pi} drd\theta d\phi r^2 \sin\theta \frac{|u_0(r)|^2}{r^2}|Y_0^0(\theta,\phi)|^2 = 1 \;\; \Leftrightarrow \;\; \Leftrightarrow \;\; \int_0^{\infty} dr|u_0(r)|^2 = 1$$

car les harmoniques sphériques sont déjà normalisées. Ainsi

$$
\begin{aligned}
\int_0^\infty dr|u_0(r)|^2 &= 1 \\
\int_0^1 dr|A|^2\sin^2(\alpha r) + \int_1^\infty dr|A|^2\sin^2(\alpha)e^{2\epsilon(1-r)} &= 1 \\
|A|^2\int_0^1 \frac{1-\cos(2\alpha r)}{2} - \frac{|A|^2\sin^2(\alpha)}{2\epsilon}e^{2\epsilon(1-r)}\Big|_1^\infty &= 1 \\
|A|^2\Big(\frac{r}{2} - \frac{\sin(2\alpha r)}{4\alpha}\Big)\Big|_0^1 + \frac{|A|^2\sin^2(\alpha)}{2\epsilon} &= 1 \\
|A|^2\Big(\frac{1}{2} - \frac{\sin(2\alpha)}{4\alpha}\Big) + \frac{|A|^2\sin^2(\alpha)}{2\epsilon} &= 1 \\
|A|^2\Big(\frac{1}{2} - \frac{\sin(2\alpha)}{4\alpha} + \frac{\sin^2(\alpha)}{2\epsilon}\Big) &= 1 \\
|A|^2\Big(\frac{1}{2} - \frac{2\sin(\alpha)\cos(\alpha)}{4\alpha} + \frac{\sin^2(\alpha)}{2\epsilon}\Big) &= 1 \\
|A|^2\Big(\frac{1}{2} + \frac{2\alpha\cos(\alpha)\cos(\alpha)/\epsilon}{4\alpha} + \frac{\sin^2(\alpha)}{2\epsilon}\Big) &= 1 \qquad \text{car } \tan\alpha = -\alpha/\epsilon \Leftrightarrow \sin\alpha = -\alpha\cos\alpha/\epsilon \\
|A|^2\Big(\frac{1}{2} + \frac{\cos^2(\alpha)}{2\epsilon} + \frac{\sin^2(\alpha)}{2\epsilon}\Big) &= 1 \\
|A|^2\Big(\frac{1}{2} + \frac{1}{2\epsilon}\Big) &= 1 \\
A &= \sqrt{\frac{2\epsilon}{1+\epsilon}}
\end{aligned}
$$

Graphiquement, les fonctions auront l'air de ceci :



À l'intérieur du puits, on a une fonction sinusoïdale et à l'extérieur, une exponentielle qui décroit. Ainsi, contrairement au cas classique, il y a une probabilité non nulle de se trouver à l'extérieur du puits. Toutefois, cette probabilité diminue quand on s'éloigne du puits.

Exercice g

$$
\begin{aligned}
P &= \int_1^\infty dr|A|^2 \sin^2(\alpha) e^{2\epsilon(1-r)} \\
&= \int_1^\infty dr \frac{2\epsilon}{1+\epsilon} \sin^2(\alpha) e^{2\epsilon(1-r)} \\
&= \frac{2\epsilon}{1+\epsilon} \frac{\sin^2(\alpha)}{2\epsilon} e^{2\epsilon(1-r)}\Big|_1^\infty \\
&= \frac{\sin^2(\alpha)}{1+\epsilon}
\end{aligned}
$$

Or

$$\frac{1}{\sin^2(\alpha)} = 1 + \frac{\cos^2(\alpha)}{\sin^2(\alpha)} = 1 + \frac{\epsilon^2}{\alpha^2} = \frac{\alpha^2+\epsilon^2}{\alpha^2} = \frac{V_0}{V_0+E}$$

Et donc

$$P = \frac{V_0+E}{V_0(1+\sqrt{-E})}$$

Exercice supplémentaire :

Application physique : l'interaction nucléaire forte entre un proton ($m_p = 1.672622 \cdot 10^{-27}$ kg) et un neutron ($m_n = 1.674927 \cdot 10^{-27}$ kg) peut être modélisée par un puits carré de rayon $a = 1.5$ fm et de profondeur $V_0 = 59.64$ MeV.

1. Pour se ramener au calcul précédent, que représentent physiquement les variables r et m dans ce cas ?
2. Combien d'états liés ce système possède-t-il ?
3. Déterminer numériquement les énergies de liaison.
4. Calculer les probabilités P_{n_r}.

1)
r représente le rayon entre les deux particules.
m représente la masse réduite

$$m = \frac{m_n m_p}{m_n + m_p} = 8.36887 \times 10^{-28} kg$$

2)
Si on reprend les équations dérivées plus tôt, mais pour des valeurs arbitraires de a, $\hbar$ et $2m$, alors il faut poser $\alpha = \sqrt{\frac{2ma^2}{\hbar^2}(V_0 + E)}$ et $\epsilon = \sqrt{-\frac{2ma^2}{\hbar^2}E}$. Le nombre d'états liés est alors $\left[\sqrt{\frac{2mV_0}{\hbar^2\pi^2}}a + 1/2\right] + 1$. Notons que

$$\frac{\hbar^2}{2ma^2} = \frac{(1.054 \times 10^{-34})^2}{2 \times 8.37 \times 10^{-28} \times (1.5 \times 10^{-15})^2} = 2.92 \times 10^{-12} J = 18.23 MeV$$

ou on utilise la conversion $1J = 6,242 \times 10^{18} eV$. Alors, le nombre d'états liés devient

$$\left[\sqrt{\frac{2mV_0}{\hbar^2\pi^2}}a + 1/2\right] + 1 = \left[\sqrt{\frac{1}{18.23MeV}\frac{59.64MeV}{\pi^2}} + 1/2\right] + 1 = \left[0.58 + 0.5\right] + 1 = 2$$

3)
Puisqu'il n'y a que deux états liés, il y a une seule énergie de liaison non nulle. Numériquement, en résolvant l'équation

$$\tan(\alpha) = -\frac{\alpha}{\sqrt{\frac{2ma^2}{\hbar^2}V_0 - \alpha^2}}$$

pour $V_0 = 59.64$ MeV, on trouve que $\alpha = 0$ et $\alpha = 1.77188$ et donc l'énergie de liaison non-nulle est

$$E = \frac{\hbar^2}{2ma^2}\alpha^2 - V_0 = -2.41 MeV$$

4)

$$P(r > 1) = \frac{V_0 + E}{V_0(1 + \sqrt{-E\frac{2ma^2}{\hbar^2}})} = 85\%$$

Mécanique quantique I

Suite de la séance d'exercices 1 : Oscillateur harmonique à trois dimensions

1. Écrire l'équation de Schrödinger en coordonnées sphériques de l'oscillateur harmonique à trois dimensions.
2. Exprimer les unités de temps, d'énergie et de longueur en fonction des paramètres du problème, puis choisir $\hbar = m = \omega = 1$ et réécrire l'équation de Schrödinger dans ces unités. Résoudre alors par séparation des variables en supposant que la partie radiale a une solution de la forme $r^{-1}u_l(r)$.
3. En utilisant les postulats, chercher la solution physique $u_l(r)$ de l'équation radiale :
   (a) Déterminer $u_{r\to\infty}(r)$, la solution approchée de l'équation de Schrödinger dans la régime asymptotique (obtenu en faisant tendre r vers l'infini).
   (b) Poser $u_l(r) = u_{r\to\infty}(r)v_l(r)$ et en déduire l'équation satisfaite par $v_l(r)$.
   (c) Autour du point singulier régulier $r = 0$, en posant le développement en série entière suivant
   $$v_l(r) = r^s \sum_{i=0}^{\infty} a_i\, r^i, \quad a_0 \neq 0.$$
   en déduire le système d'équations pour les coefficients a_i.
   (d) Finalement, résoudre ce système d'équations en exprimant s et a_i en fonction des paramètres du problème.
   (e) Déterminer le rayon de convergence r_c de la série $\sum_{j=0}^{\infty} c_j\, r^j$ donné par
   $$\frac{1}{r_c} = \lim_{j\to\infty} \left| \frac{c_{j+1}}{c_j} \right|.$$
   Déduire du comportement asymptotique de la fonction d'onde ainsi que de ses conditions aux bornes une condition de quantification de l'énergie.
4. À partir des résultats obtenus précédemment, il est possible d'écrire les fonctions radiales
   $$R_{n_r,l}(r) = e^{-r^2/2} r^l\, c_0 \frac{n_r!\Gamma(l+3/2)}{\Gamma(n_r+l+3/2)}\, L_{n_r}^{l+1/2}(r^2)$$
   où $n_r = \frac{n-l}{2}$ et $E = n + 3/2$.
   Pour $n = 0$ et 1, normer les fonctions d'onde.
5. Application : (Si le temps le permet)
   Un nanocristal (ou "particule quantique" ou "q(uantum) dot") constitué d'arséniure de gallium (GaAs) possède des propriétés optiques très particulières du fait de la quantification des niveaux d'énergie des électrons de conduction piégés en son sein. Un modèle simpliste pour ces électrons de conduction est de considérer qu'ils ont une masse effective de $0.067m_e$ et qu'ils sont soumis à un potentiel harmonique de force $\hbar\omega = 4$ meV. Calculer les énergies accessibles aux électrons de conduction. Sachant que, pour le cristal infini de GaAs, le gap est de 1.42 eV, en déduire l'énergie minimale d'un photon émis par un électron passant de l'état de conduction le plus bas à l'état de valence le plus élevé.

Rappel :

Polynômes de Laguerre généralisés

$$L_n^\alpha(z) = \frac{\Gamma(n+\alpha+1)}{n!\,\Gamma(\alpha+1)}\,{}_1F_1(-n,\alpha+1,z),$$

$${}_1F_1(a,c,z) = 1 + \frac{a}{c}\frac{z}{1!} + \frac{a(a+1)}{c(c+1)}\frac{z^2}{2!} + \cdots = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\Gamma(a+n)}{\Gamma(a)}\frac{\Gamma(c)}{\Gamma(c+n)}\frac{z^n}{n!},$$

$$\Gamma(z) = \int_0^\infty du\, u^{z-1} e^{-u}, \quad z \in \mathbb{C},$$

$$\Gamma(n) = (n-1)! \quad \text{et} \quad \Gamma\left(n+\frac{1}{2}\right) = \frac{(2n)!}{4^n n!}\sqrt{\pi}, \quad n \in \mathbb{N},$$

Harmoniques sphériques

$$Y_l^m(\theta,\phi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\sqrt{\frac{2l+1}{2}\frac{(l-m)!}{(l+m)!}}\,P_{lm}(\cos\theta)\,e^{im\phi},$$

$$P_{lm}(x) = \frac{(-1)^m}{2^l\,l!}(1-x^2)^{\frac{m}{2}}\frac{d^{l+m}}{dx^{l+m}}(x^2-1)^l.$$

Mécanique Quantique 1 —– CORRIGÉ

Suite de la séance d'exercices 1 : oscillateur harmonique à trois dimensions

Exercice 1

L'équation de Schrödinger stationnaire est

$$\Big[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2+V(r)\Big]\psi(\vec{r})=E\psi(\vec{r}).$$

Dans le cas de l'oscillateur harmonique, le potentiel est

$$V(r)=\frac{1}{2}m\omega^2r^2.$$

Pour écrire l'équation de Schrödinger en coordonnées sphériques, il suffit d'écrire le Laplacien en coordonnées sphériques :

$$\begin{aligned}
\nabla^2 &= \frac{1}{r}\frac{\partial^2}{\partial r^2}r-\frac{L^2}{\hbar^2r^2}\\
&= \frac{1}{r}\frac{\partial^2}{\partial r^2}r-\frac{\hbar^2}{i^2}\frac{(\vec{r}\times\vec{\nabla})^2}{\hbar^2r^2}\\
&= \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\Big(r^2\frac{\partial}{\partial r}\Big)+\frac{1}{r^2\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\Big(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\Big)+\frac{1}{r^2\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}
\end{aligned}$$

et l'équation de Schrödinger devient donc

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Big[\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\Big(r^2\frac{\partial}{\partial r}\Big)+\frac{1}{r^2\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\Big(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\Big)+\frac{1}{r^2\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}\Big]\psi+\frac{1}{2}m\omega^2r^2\psi=E\psi.$$

$$-\Big[\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\Big(r^2\frac{\partial}{\partial r}\Big)+\frac{1}{r^2\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\Big(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\Big)+\frac{1}{r^2\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}\Big]\psi+\frac{m^2\omega^2}{\hbar^2}r^2\psi=\frac{2m}{\hbar^2}E\psi.$$

Exercice 2

Si on pose $\hbar=\omega=m=1$ les unités de temps, d'énergie et de longueur deviennent :

$$[temps]=\frac{1}{[\omega]}=1$$

$$[energie]=[\hbar][\omega]=1$$

$$[longueur]=\sqrt{\frac{[\hbar]}{[m\omega]}}=1$$

Pour l'équation de Schrödinger radiale, on utilise la séparation des variables en posant $\psi(\vec{r})=R(r)Y(\theta,\phi)$. On peut alors réécrire l'équation trouvée à l'exercice 1 (dans les nouvelles unités) :

$$-\Big[\frac{\partial}{\partial r}\Big(r^2\frac{\partial}{\partial r}\Big)+\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\Big(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\Big)+\frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}\Big]R(r)Y(\theta,\phi)+r^4R(r)Y(\theta,\phi)=2Er^2R(r)Y(\theta,\phi)$$

ou encore

$$\left[\frac{\partial}{\partial r}\Big(r^2\frac{\partial}{\partial r}\Big)-r^4+2r^2E\right]R(r)Y(\theta,\phi)=-\left[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\Big(\sin\theta\frac{\partial Y}{\partial\theta}\Big)+\frac{1}{r^2\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}\right]R(r)Y(\theta,\phi)$$

$$Y(\theta,\phi)\left[\frac{\partial}{\partial r}\Big(r^2\frac{\partial}{\partial r}\Big)-r^4+2r^2E\right]R(r)=-R(r)\left[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\Big(\sin\theta\frac{\partial Y}{\partial\theta}\Big)+\frac{1}{r^2\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}\right]Y(\theta,\phi)$$

$$Y(\theta,\phi)\left[\frac{\partial}{\partial r}\Big(r^2\frac{\partial}{\partial r}\Big)-r^4+2r^2E\right]R(r)=-R(r)L^2Y(\theta,\phi)$$

$$Y(\theta,\phi)\left[\frac{\partial}{\partial r}\Big(r^2\frac{\partial}{\partial r}\Big)-r^4+2r^2E\right]R(r)=R(r)\,l(l+1)Y(\theta,\phi)$$

$$\left[\frac{\partial}{\partial r}\Big(r^2\frac{\partial}{\partial r}\Big)-r^4+2r^2E\right]R(r)=l(l+1)R(r)$$

où on a utilisé le fait

$$-\left[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\Big(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\Big)+\frac{1}{r^2\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}\right]Y(\theta,\phi)=-L^2Y(\theta,\phi)=l(l+1)$$

On doit donc résoudre l'équation radiale suivante

$$\left[\frac{\partial}{\partial r}\Big(r^2\frac{\partial}{\partial r}\Big)-r^4+2r^2E\right]R(r)=l(l+1)R(r)$$

Posons $u(r)=rR(r)$. Puisque

$$R=\frac{u}{r},\qquad \frac{dR}{dr}=\frac{1}{r^2}\Big(r\frac{du}{dr}-u\Big),\qquad \frac{d}{dr}\Big(r^2\frac{dR}{dr}\Big)=r\frac{d^2u}{dr^2}$$

On obtient

$$r\frac{d^2u}{dr^2}-r^3u+2urE=l(l+1)\frac{u}{r}$$

ou encore

$$-\frac{d^2}{dr^2}u(r)+V_{eff}u(r)=2Eu(r)\qquad\text{avec}\qquad V_{eff}=r^2+\frac{l(l+1)}{r^2}$$

L'équation ci-dessus est l'équation radiale. On remarque qu'elle a la même forme que l'équation de Schrödinger en une dimension.

Exercice 3

a)
Si $r\to\infty$, $l(l+1)/r^2\to 0$ et $2E\ll r^2$. Ainsi, l'équation radiale devient simplement $u''(r)-r^2u(r)=0$. Sa solution assymptotique est $u(r)=e^{\pm r^2/2}$. En effet

$$u''(r)=\Big(e^{\pm r^2/2}\Big)''=\Big(\pm re^{\pm r^2/2}\Big)'=\pm e^{\pm r^2/2}+r^2e^{\pm r^2/2}=e^{\pm r^2/2}(r^2\pm 1)$$

Or à nouveau, $r\to\infty$ et donc $1\ll r^2$, ce qui nous permet de dire que $u''(r)=r^2e^{\pm r^2/2}=r^2u(r)$ et on retrouve bien l'équation différentielle de départ. Notons que même si mathématiquement on a deux solutions admissibles ($e^{r^2/2}$ et $e^{-r^2/2}$), seule la deuxième est acceptable, car la fonction $u(r)$

doit être bornée partout. En effet, les fonctions qui représentent une solution physique doivent être carré intégrable, c'est à dire que $\int_{-\infty}^{\infty} |u(r)|^2 dr < \infty$. Ainsi,

$$u_{r\to\infty}(r) = e^{-r^2/2}$$

b)
Posons $u(r) = u_{r\to\infty}(r)v(r)$ et remplaçons la fonction dans l'équation différentielle

$$u''(r) - r^2 u(r) - \frac{l(l+1)}{r^2} u(r) = -2Eu(r)$$

On a donc

$$\begin{aligned} u(r) = e^{-r^2/2} v(r) \qquad &\Rightarrow \qquad u'(r) = e^{-r^2/2}\big(v'(r) - rv(r)\big) \\ &\Rightarrow \qquad u''(r) = e^{-r^2/2}\big(v''(r) - 2rv'(r) - v(r)(1-r^2)\big) \end{aligned}$$

et l'équation différentielle pour $v(r)$ devient

$$v''(r) - 2rv'(r) + \Big(2E - 1 - \frac{l(l+1}{r^2}\Big) v(r) = 0$$

c)
On pose

$$v(r) = r^s \sum_{i=0}^{\infty} a_i r^i \qquad a_0 \neq 0$$

Alors,

$$\begin{aligned} v'(r) &= \sum_{i=0}^{\infty} (i+s) a_i r^{i+s-1} \\ v''(r) &= \sum_{i=0}^{\infty} (i+s)(i+s-1) a_i r^{i+s-2} \end{aligned}$$

et l'équation différentielle pour $v(r)$ devient :

$$\sum_{i=0}^{\infty} \Big[(i+s)(i+s-1) - l(l+1)\Big] a_i r^{i+s-2} + \sum_{i=0}^{\infty} \Big[2E - 1 - 2(i+s)\Big] a_i r^{i+s} = 0$$

En posant $j = i - 2$, la première somme devient

$$\begin{aligned} \sum_{j=-2}^{\infty} \Big[(j+2+s)(j+1+s) - l(l+1)\Big] a_{j+2} r^{j+s} &= \Big(s(s-1) - l(l+1)\Big) a_0 r^{s-2} + \Big(s(s+1) - l(l+1)\Big) a_1 r^{s-1} \\ &+ \sum_{j=0}^{\infty} \Big[(j+2+s)(j+1+s) - l(l+1)\Big] a_{j+2} r^{j+s} \end{aligned}$$

et on peut réécrire l'équation différentielle :

$$\begin{aligned} 0 &= \Big(s(s-1) - l(l+1)\Big) a_0 r^{s-2} + \Big(s(s+1) - l(l+1)\Big) a_1 r^{s-1} \\ &+ \sum_{j=0}^{\infty} \Big[\Big((j+2+s)(j+1+s) - l(l+1)\Big) a_{j+2} + \Big(2E - 1 - 2(j+s)\Big) a_j\Big] r^{j+s} \end{aligned}$$

Puisque cette équation est vraie pour tout r, il faut que les coefficients en avant de r s'annulent. En d'autres termes, on a

$$\begin{cases} \Big(s(s-1)-l(l+1)\Big)a_0 = 0 & (1)\\ \Big(s(s+1)-l(l+1)\Big)a_1 = 0 & (2)\\ \Big((j+2+s)(j+1+s)-l(l+1)\Big)a_{j+2} + \Big(2E-1-2(j+s)\Big)a_j = 0 & (3)\end{cases}$$

d)
Puisque $a_0 \neq 0$, la première équation nous indique que $s = -l$ ou $s = l+1$. Cependant, encore une fois, il faut que la fonction $v(r)$ soit bornée et donc il faut que la puissance de r soit positive. On choisira donc $s = l+1$.
La deuxième équation elle nous indique que $a_1 = 0$, car $l \geq 0$.
Finalement, la troisième équation nous indique que

$$a_{j+2} = -\frac{2E-1-2(j+s)}{(j+2+s)(j+1+s)-l(l+1)}a_j = \frac{-2E+1+2(j+l+1)}{(j+l+3)(j+l+2)-l(l+1)}a_j$$

Comme $a_1 = 0$, tous les coefficients impairs seront nuls. On peut donc réécrire la fonction $v(r)$:

$$v(r) = r^s\sum_{i=0}^{\infty} a_{2i}r^{2i} + r^s\sum_{i=0}^{\infty} a_{2i+1}r^{2i+1} = r^s\sum_{i=0}^{\infty} a_{2i}r^{2i} = r^s\sum_{i=0}^{\infty} c_i r^{2i}$$

avec

$$c_{i+1} = \frac{-2E+3+2l+4i}{4l+6+(4l+10)i+4i^2}c_i$$

qu'on trouve en posant $j = 2i$ dans la définition de a_{j+2} puis en redéfinissant $a_{2j+2} = c_{i+1}$.

e)
Le rayon de convergence est donné par

$$\begin{aligned}\frac{1}{r_c} &= \lim_{i\to\infty}\left|\frac{c_{i+1}}{c_i}\right|\\ &= \lim_{i\to\infty}\left|\frac{-2E+3+2l+4i}{4l+6+(4l+10)i+4i^2}\right|\\ &= \lim_{i\to\infty}\left|\frac{4}{(4l+10)+4i}\right|\\ &= 0\end{aligned}$$

Le rayon de convergence est donc infini.
Maintenant, si on regarde le comportement asymptotique de la fonction, on ne se concentre que sur les termes pour lesquelles l'indice $i \to \infty$. Ainsi, quand $i \to \infty$,

$$\left|\frac{c_{i+1}}{c_i}\right| \to \frac{4}{(4l+10)+4i} = \frac{1}{(4l+10)/4+i} \approx \frac{1}{i}$$

Par conséquent $c_{i+1} \approx c_i/i$, ou encore,

$$c_i \approx \frac{c_{i-1}}{i-1} \approx \frac{c_{i-2}}{(i-1)(i-2)} \approx ... \approx \frac{c_0}{(i-1)!}$$

et

$$v(r)=c_0r^{l+1}\sum_{i=0}^{\infty}\frac{1}{(i-1)!}r^{2i}=c_0r^{l+1}\sum_{i=0}^{\infty}\frac{1}{(i-1)!}r^{2i}r^2r^{-2}=c_0r^{l+3}\sum_{i=0}^{\infty}\frac{r^{2(i-1)}}{(i-1)!}=c_0r^{l+3}e^{r^2}$$

ce qui permet de réécrire la fonction $u(r)$

$$u(r)=e^{-r^2/2}v(r)=c_0e^{-r^2/2}r^{l+3}e^{r^2}=c_0e^{r^2/2}r^{l+3}$$

Seulement, cette fonction n'est pas bornée quand $\rightarrow\infty$ ce qui veut dire qu'il faut tronquer la somme à une certain moment. En d'autres mots, à partir d'un certain i, les coefficients c_i seront tous nuls. Donc à partir d'un certain i

$$c_{i+1}=0 \qquad c_i\neq 0 \qquad \Rightarrow \qquad -2E+3+2l+4i=0 \qquad \Rightarrow \qquad E=2i+l+\frac{3}{2}=n+\frac{3}{2}$$

Ce qu'on observe ici c'est que le fait de tronquer la somme nous amène une condition de quantification, puisque l'énergie prend des valeurs discrètes (qui dépendent de i et l).

Exercice 4

Tout d'abord, pour ceux qui le souhaitent, voici comment trouver $R_{n_r,l}(r)$:
À partir des résultats de la partie 1, on peut écrire la fonction $R_{n_r,l}(r)$:

$$\begin{aligned}
R_{n_r,l}(r) &= r^{-1}u_{n_r,l}(r)\\
&= r^{-1}e^{-r^2/2}v_{n_r,l}(r)\\
&= r^{-1}e^{-r^2/2}r^{l+1}\sum_{i=0}^{\infty}c_i(n_r,l)r^{2i} \qquad \text{avec } c_{i+1}=\frac{-2E+3+2l+4i}{4l+6+(4l+10)i+4i^2}c_i\\
&= e^{-r^2/2}r^{l}\sum_{i=0}^{\infty}c_i(n_r,l)r^{2i}
\end{aligned}$$

Pour l'instant, les coefficients c_i ne semblent pas dépendre explicitement de n_r, mais seulement de l. Pour remidier à la situation, on se rappelle que $l=n-2n_r \Leftrightarrow n=l+2n_r$ et $E=n+3/2 \Leftrightarrow -2E+3=-2n=-2l-4n_r$ ce qui nous permet de réécrire le coefficient c_{i+1} :

$$c_{i+1}=\frac{-2E+3+2l+4i}{4l+6+(4l+10)i+4i^2}c_i=\frac{-2l-4n_r+2l+4i}{4(i+1)(l+3/2+i)}c_i=\frac{-n_r+i}{(i+1)(l+3/2+i)}c_i$$

. Calculons les premiers termes :

$$c_1=\frac{-n_r}{l+3/2}c_0$$

$$c_2=\frac{-n_r+1}{2(l+3/2+1)}c_1=\frac{-n_r+1}{2(l+3/2+1)}\times\frac{-n_r}{l+3/2}c_0$$

$$c_3=\frac{-n_r+2}{3(l+3/2+2)}c_2=\frac{-n_r+2}{3(l+3/2+2)}\times\frac{-n_r+1}{2(l+3/2+1)}\times\frac{-n_r}{l+3/2}c_0$$

etc.

La fonction $R_{n_r,l}(r)$ peut donc se réécrire ainsi :

$$
\begin{aligned}
R_{n_r,l}(r) &= e^{-r^2/2} r^l\, c_0 \Bigg(1 \;+\; \frac{-n_r}{l+3/2} r^2 \;+\; \frac{-n_r+1}{2(l+3/2+1)} \frac{-n_r}{l+3/2} r^4 \;+ \\
&\qquad \frac{-n_r+2}{3(l+3/2+2)} \frac{-n_r+1}{2(l+3/2+1)} \frac{-n_r}{l+3/2} r^6 \;+\; ... \Bigg) \\
&= e^{-r^2/2} r^l\, c_0\, {}_1F_1(-n_r, l+3/2, r^2) \\
&= e^{-r^2/2} r^l\, c_0 \frac{n_r! \Gamma(l+3/2)}{\Gamma(n_r+l+3/2)}\, L_{n_r}^{l+1/2}(r^2)
\end{aligned}
$$

n_r représente le nombre de noeuds de la fonction $R_{n_r,l}$, c'est-à-dire le nombre de fois que la densité de probabilité s'annule.

On peut maintenant normaliser les fonctions :
<u>n=0</u>

$$n = 2n_r + l = 0 \qquad \Leftrightarrow \qquad n_r = 0 \quad \text{et} \quad l = 0$$

Ceci correspond à l'état fondamental. La fonction d'onde est

$$\psi_{0,0,0}(\vec{r}) = R_{0,0}(r) Y_0^0(\theta,\phi) = e^{-r^2/2} c_0 L_0^{1/2}(r^2) \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \sqrt{\frac{1}{2}} = e^{-r^2/2} c_0 \frac{1}{\sqrt{4\pi}}$$

car $L_0^\alpha(x) = 1$. Pour normaliser la fonction il suffit de trouver la valeur de c_0 telle que l'intégrale de la norme au carrée de la fonction donne 1. Attention, n'oubliez pas qu'on intègre en coordonnée sphériques et qu'il faut donc rajouter le jacobien $r^2 \sin\theta$.

$$
\begin{aligned}
1 &= \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^{\pi} \sin\theta d\theta \int_0^{\infty} dr\, r^2 |\psi_{0,0,0}(\vec{r})|^2 \\
&= \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^{\pi} \sin\theta d\theta \frac{1}{4\pi}\; |c_0|^2 \int_0^{\infty} dr\, r^2 e^{-r^2} \\
&= 4\pi \frac{1}{4\pi} |c_0|^2 \int_0^{\infty} dr\, r^2 e^{-r^2} \\
&= |c_0|^2 \int_o^{\infty} \frac{dt}{2\sqrt{t}} t e^{-t} \qquad \text{en posant } t = r^2 \;\Rightarrow\; dt = 2rdr \\
&= \frac{|c_0|^2}{2} \int_o^{\infty} t^{1/2} e^{-t} dt \\
&= \frac{|c_0|^2}{2} \Gamma(3/2) \\
&= \frac{|c_0|^2}{2} \frac{1}{2} \Gamma(1/2) \\
&= \frac{|c_0|^2}{4} \sqrt{\pi}
\end{aligned}
$$

Et donc $|c_0| = \frac{2}{\pi^{1/4}}$ et la fonction d'onde normalisée s'écrit

$$\psi_0(\vec{r}) = \frac{1}{\pi^{3/4}} e^{-r^2/2}$$

Notez qu'en fait il n'est pas nécessaire de trouver la valeur de l'harmonique sphérique Y_0^0 pour normaliser la fonction d'onde. En effet, on sait que les harmoniques, intégrées sur les angles, sont déjà normalisées :

$$\int_0^{2\pi} d\phi \int_0^{\pi} \sin\theta d\theta \, Y_l^{m*}(\theta,\phi) Y_{l'}^{m'}(\theta,\phi) = \delta_{ll'}\delta mm' \quad \Rightarrow \quad \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^{\pi} \sin\theta d\theta \, |Y_l^m(\theta,\phi)|^2 = 1$$

Ainsi, pour tous les nombres quantiques n_r, l et m, normaliser $\psi_{n_r,l,m}$ revient à simplement normaliser la fonction radiale. C'est-à-dire qu'il suffit de trouver le c_0 tel que

$$\int_0^{\infty} dr \, r^2 |R_{n_r,l}|^2 = 1.$$

<u>n=1</u>

$$n = 2n_r + l = 1 \qquad \Leftrightarrow \qquad n_r = 0 \quad \text{et} \quad l = 1$$

La fonction d'onde est donc

$$\psi_{0,1,m}(\vec{r}) = R_{0,1}(r) Y_1^m(\theta,\phi) = e^{-r^2/2} r c_0 \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \sqrt{\frac{3(1-m)!}{2(1+m)!}} P_{1,m}(cos\theta) e^{im\phi}$$

avec

$$P_{1,m}(x) = \frac{(-1)^{m+1}}{2} (1-x^2)^{m/2}(\theta) \frac{d^{1+m}}{dx^{1+m}}(x^2-1)$$

Puisque les harmoniques sphériques sont déjà normalisées, on ne s'occupe que de la partie radiale et on a donc

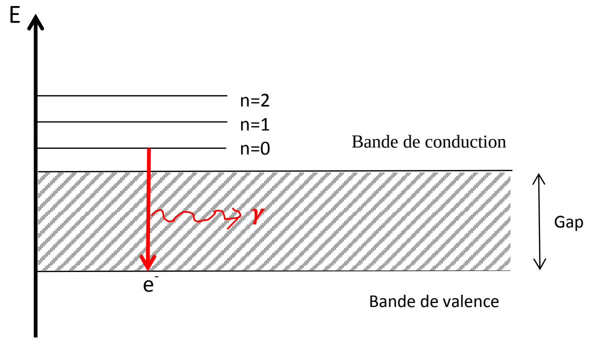
$$\begin{aligned}
1 &= \int dr \, r^2 |R_{0,1}|^2 \\
&= \int_0^{\infty} dr \, r^2 |c_0|^2 e^{-r^2} r^2 \\
&= |c_0|^2 \int_0^{\infty} dr \, r^4 e^{-r^2} \\
&= |c_0|^2 \int_o^{\infty} \frac{dt}{2\sqrt{t}} t^2 e^{-t} \qquad \text{en posant } t = r^2 \ \Rightarrow \ dt = 2rdr \\
&= \frac{|c_0|^2}{2} \int_o^{\infty} t^{3/2} e^{-t} dt \\
&= \frac{|c_0|^2}{2} \Gamma(5/2) \\
&= \frac{|c_0|^2}{2} \frac{3}{2} \frac{1}{2} \Gamma(1/2) \\
&= \frac{3|c_0|^2}{8} \sqrt{\pi}
\end{aligned}$$

Et donc $|c_0| = \frac{2\sqrt{2}}{\sqrt{3}\pi^{1/4}}$ et la fonction d'onde normalisée s'écrit

$$\psi_{0,1,m}(\vec{r}) = \frac{\sqrt{2}}{\pi^{3/4}} e^{-r^2/2} r \sqrt{\frac{(1-m)!}{(1_m)!}} P_{1,m}(\cos\theta) e^{im\phi}$$

Exercice 5

Un électron ne peut prendre comme valeur d'énergie, que celles comprises dans une certaine bande. La dernière bande complètement remplie est la bande de valence. Celle-ci est pleine d'électrons, mais ne contribue pas au phénomène de conduction. La bande permise d'énergies suivante est la bande de conduction. C'est elle qui permet aux électrons de circuler. Entre les deux bandes, il y a une bande interdite dénommée gap (voir la figure). Cette bande est inexistante dans les métaux conducteurs.



Puisque les électrons sont soumis à un potentiel harmonique, les énergies admissibles sont $E_n = \hbar\omega(n + 3/2)$ et en particulier, l'énergie fondamentale est

$$E_0 = \frac{3}{2}\hbar\omega = \frac{3}{2}4meV = 6meV$$

L'énergie minimale qu'aura un photon émis par un électron passant de l'état de conduction le plus bas à l'état de valence le plus élevé sera donc :

$$E_{min} = E_0 + E_{gap} = 6meV + 1.42eV = 6 \times 10^-3eV + 1.42eV = 1.426eV$$

On peut calculer sa longueur d'onde :

$$\begin{aligned}
E_\gamma = 1.426\,eV = h\nu \quad &\Leftrightarrow \quad \nu = \frac{1.426\,eV}{h} \\
&\Leftrightarrow \quad \nu = \frac{1.426 \times 1.60217653 \times 10^{-19}\,J}{6,62606957 \times 10^{-34} J.s} \\
&\Leftrightarrow \quad \nu = 3.448 \times 10^{14}\,Hz \\
&\Leftrightarrow \quad \lambda = \frac{c}{\nu} = \frac{299\,792\,458\,m/s}{3.448 \times 10^{14}\,Hz} \\
&\Leftrightarrow \quad \lambda = 869\,nm
\end{aligned}$$

ce qui se situe dans l'infrarouge..